

УДК 539.31

© 1999 г. Н.Ф. МОРОЗОВ, М.В. ПАУКШТО, П.Е. ТОВСТИК

**О ДЕПЛАНАЦИИ ГРАНИ КРИСТАЛЛА
В УСЛОВИЯХ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФФУЗИИ**

Грань монокристалла подвергается кратковременному (10^{-7} – 10^{-6} с, $(6-15) \cdot 10^4$ Мвт/м²) лазерному облучению. В результате такого облучения экспериментально обнаружена [1, 2] возможность потери плоской формы у облучаемой грани и появления волнистости. На фигуре представлен профиль поверхности (размеры в микрометрах), полученный с помощью атомно-силового микроскопа Р4-SPM ("НТ-МДТ"). Изображена (фиг., а) волнистая поверхность зеркала из нержавеющей стали, светлым участкам соответствуют "возвышенности", темным – "впадины". По линии А-А (фиг., б) построен профиль поверхности поперек гребней волн, а по линии В-В (фиг., с) – вдоль гребней волн. Длины волн поперек и вдоль гребней примерно равны 1 мкм и 1,75 мкм соответственно, а их амплитуда – примерно 0,02 мкм.

Ниже предпринята попытка найти объяснение обнаруженному эффекту в рамках механики сплошных сред. Работа является продолжением статей авторов [3, 4].

1. Постановка задачи. Твердое тело занимает полупространство $z < 0$ с первоначально плоской поверхностью $z = 0$. Предполагаем наличие приповерхностного слоя, температура которого T_1 , остальной объем полупространства имеет температуру T_0 . Представляются возможными три причины появления волнистости: термонапряжения, объемная диффузия и поверхностная диффузия. Первые два механизма исследованы в [3, 4] и обнаружено, что потеря плоской формы грани по указанным причинам происходит при температурах выше температуры плавления и, следовательно, не реализуется. Проанализируем механизм поверхностной диффузии на основе подхода [5–9]. Используем для задачи о поверхностной диффузии химический потенциал в форме

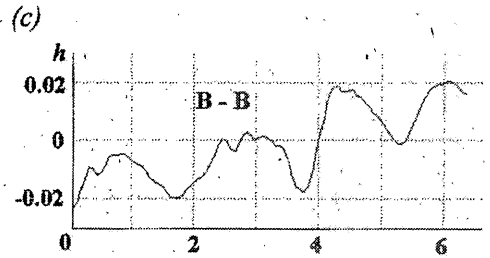
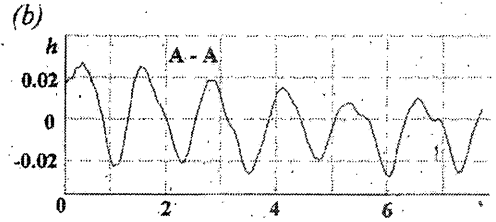
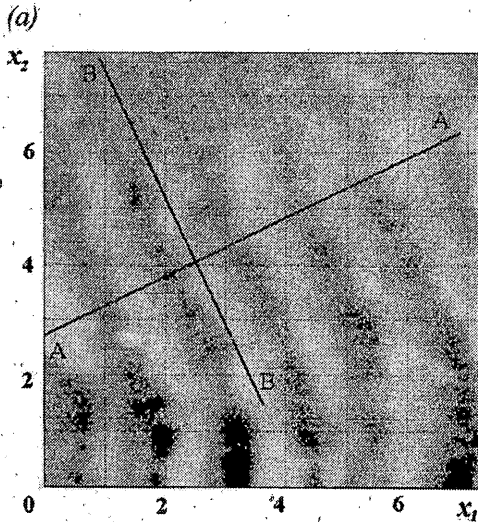
$$\chi = (U - \gamma\kappa)V \quad (1.1)$$

где U – плотность упругой энергии, вычисляемая в точках поверхности, γ – постоянная материала, κ – средняя кривизна поверхности, V – объем кристаллической ячейки основной структуры.

Вектор количества переносимой примеси записывается в традиционной форме

$$\mathbf{J} = -\frac{DC}{kT_1} \nabla_s \chi \quad (1.2)$$

Здесь T_1 – абсолютная температура поверхностного слоя, k – постоянная Больцмана, C – количество диффундирующей на поверхности примеси на единицу площади, ∇_s – оператор градиента, действующий по поверхностным координатам x_1, x_2 .



Из условия сохранения массы и формулы (1.2) получаем

$$v_n = -V \operatorname{div} \mathbf{J} = \frac{DCV^2}{kT_1} \Delta(U - \gamma \kappa) \quad (1.3)$$

Обозначая волнистость функцией $h(x_1, x_2, t)$, в силу слабой волнистости, т.е. при выполнении условия

$$\sqrt{h_{x_1}^2 + h_{x_2}^2} \ll 1 \quad (1.4)$$

находим

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = \frac{\partial^2 h}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial x_2^2} = \Delta h \quad (1.5)$$

Далее в рассматриваемом приближении имеем

$$v_n = \partial h / \partial t \quad (1.6)$$

В результате получаем

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{DCV^2}{kT_1} [\Delta U(x_1, x_2, t) - \gamma \Delta^2 h(x_1, x_2, t)] \quad (1.7)$$

Для продолжения исследования требуется определить $U(x_1, x_2, 0, t)$ в задаче для полупространства со слабо возмущенной границей $z = h(x_1, x_2, t)$.

2. Учет термодиффузионного процесса. До сих пор рассуждения следовали работе [6], однако теперь модифицируем выражение для $U(x_1, x_2, 0, t)$ с учетом температурного поля $\Theta = T - T_0$ и распределения примеси C в приповерхностном слое. Положим

$$2U(x_1, x_2, 0, t) = \lambda \epsilon_{kk}^2 + 2\mu \epsilon_{ij} \epsilon_{ij} - 2(3\lambda + 2\mu)(\beta C + \alpha \Theta) \epsilon_{kk} + 2\eta \Theta C + m \Theta^2 + \delta C^2 \quad (2.1)$$

Здесь λ и μ — упругие постоянные, значения других постоянных указаны в [3, 4].

В рассматриваемом случае температура поверхностного слоя $T - T_1 = \text{const}$, распре-

деление примеси C_0 также предполагается постоянным. Обозначая через $\varepsilon_{ij}^0, \sigma_{ij}^0$ деформации и напряжения, соответствующие температурному нагружению $\Theta = T_1 - T_0$ в основном состоянии, т.е. для плоской поверхности, найдем, как и в [3, 4], что

$$\varepsilon_{ij}^0 = 0 \quad (ij \neq 33), \quad \varepsilon_{33}^0 = \frac{(3\omega - 1)[\alpha(T_1 - T_0) + \beta C_0]}{\omega + 1}, \quad \omega = \frac{\lambda + \mu}{\mu} \quad (2.2)$$

$$\sigma_{12}^0 = \sigma_{13}^0 = \sigma_{23}^0 = \sigma_{33}^0 = 0, \quad \sigma_{11}^0 = \sigma_{22}^0 = -\sigma_0, \quad \sigma_0 = 2\mu\varepsilon_{33}^0$$

Найдем плотность упругой энергии $U(x_1, x_2, 0, t)$ в случае слабого искривления $z = h(x_1, x_2, t)$ плоской поверхности. Такое возмущение приводит к изменению напряженно-деформированного состояния кристалла. Пренебрегая перераспределением температуры и концентрации примеси, будем искать соответствующие напряжения и деформации в виде

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^0 + \varepsilon_{ij}^1, \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^0 + \sigma_{ij}^1 \quad (2.3)$$

где $\varepsilon_{ij}^1, \sigma_{ij}^1$ – возмущение основного состояния. Величины $\varepsilon_{ij}^1, \sigma_{ij}^1$ малы в силу условия (1.4). Поверхность кристалла остается свободной от напряжений, следовательно,

$$\sigma_{ij}n_j = 0 \quad \text{при } z = h(x_1, x_2, t) \quad (2.4)$$

Учитывая выражения для компонент нормали к искривленной поверхности

$$n_i = -\frac{h_{x_i}}{\sqrt{1 + h_{x_1}^2 + h_{x_2}^2}}, \quad h_{x_i} = \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2), \quad n_3 = \frac{1}{\sqrt{1 + h_{x_1}^2 + h_{x_2}^2}} \quad (2.5)$$

с точностью до членов более высокого порядка малости по отношению к h_{x_i} запишем условия (2.4) в виде

$$(\sigma_{i3}^1 + \sigma_0 h_{x_i})|_{z=0} = 0 \quad (i = 1, 2), \quad \sigma_{33}^1|_{z=0} = 0 \quad (2.6)$$

Таким образом, для определения возмущения $\varepsilon_{ij}^1, \sigma_{ij}^1$ получаем задачу Черутти [10] для полупространства $z \leq 0$. Учитывая формулы (2.2) и малость ε_{ij}^1 , перепишем выражение для плотности упругой энергии в виде

$$2U = 2U^0 - 2\sigma_0(\varepsilon_{11}^1 + \varepsilon_{22}^1) + O(\varepsilon_{ij}^1 - \varepsilon_{ij}^1) \quad (2.7)$$

где U^0 – плотность упругой энергии в невозмущенном состоянии, постоянная в силу равенства (2.1).

3. Решение вспомогательной задачи. Для вычисления функции $U(x_1, x_2, 0, t)$ в соответствии с формулой (2.7) осталось решить задачу для полупространства $z \leq 0$ с граничными условиями (2.6). Используя известное решение [10], найдем

$$\varepsilon_{11}^1 + \varepsilon_{22}^1 = -\frac{\sigma_0(1 - \nu)}{2\pi\mu} \iint_{R^2} \frac{(x_1 - \xi_1)h_{\xi_1} + (x_2 - \xi_2)h_{\xi_2}}{[(x_1 - \xi_1)^2 + (x_2 - \xi_2)^2]^{3/2}} d\xi_1 d\xi_2 \quad (3.1)$$

Ищем $h(x_1, x_2, t)$ в виде

$$h = q(t)\cos(k_1 x_1)\cos(k_2 x_2) \quad (3.2)$$

Для этого случая интеграл в формуле (3.1) может быть вычислен в явной форме. Действительно, введем в рассмотрение функцию

$$F(k_1, k_2) = \frac{1}{2\pi} \iint_{R^2} \frac{\xi_1 + i\xi_2}{[\xi_1^2 + \xi_2^2]^{3/2}} e^{-i(k_1\xi_1 + k_2\xi_2)} d\xi_1 d\xi_2 \quad (3.3)$$

Тогда, используя результаты, изложенные в [11, стр. 64], имеем

$$F(k_1, k_2) = i \frac{k_1 + ik_2}{|k|}, \quad |k| = \sqrt{k_1^2 + k_2^2} \quad (3.4)$$

Теперь с учетом формулы (3.2) и очевидного равенства

$$-\sin(k_1 \xi_1) \cos(k_2 \xi_2) = \frac{1}{2} \operatorname{Im}(e^{-i(k_1 \xi_1 + k_2 \xi_2)} + e^{-i(k_1 \xi_1 - k_2 \xi_2)}) \quad (3.5)$$

представляем интеграл в формуле (3.1) в виде суммы слагаемых типа (3.3) и с учетом (3.4) получаем

$$\varepsilon_{11}^1 + \varepsilon_{22}^1 = \frac{\sigma_0(1-\nu)}{\mu} |k| h(x_1, x_2, t) \quad (3.6)$$

Учитывая соотношение (2.7), для плотности потенциальной энергии в рассматриваемом случае получаем

$$U = U^0 - \frac{\sigma_0^2(1-\nu)}{\mu} |k| h(x_1, x_2, t) + O(\varepsilon_{ij}^1 \varepsilon_{ij}^1) \quad (3.7)$$

4. Критическая волнистость. Подставляя плотность (3.7) в уравнение (1.7), для определения неизвестной функции $h(x_1, x_2, t)$ получаем уравнение

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{DCV^2}{kT_1} \left[\frac{\sigma_0^2(1-\nu)|k|}{\mu} \Delta h + \gamma \Delta^2 h \right] = 0 \quad (4.1)$$

или, учитывая вид (3.2) функции h , получаем для определения функции $q(t)$ уравнение

$$\frac{\partial q}{\partial t} + cq = 0, \quad c = \frac{DCV^2}{kT_1} \left[-\frac{\sigma_0^2(1-\nu)}{\mu} |k|^3 + \gamma |k|^4 \right] \quad (4.2)$$

Решение уравнения (4.2) при начальном условии $q(0) = q_0$ имеет вид $q = q_0 e^{-ct}$. Следуя Фройнду [6], считаем, что волнистость нарастает при условии $dq/dt > 0$, т.е. при $c < 0$ или

$$|k| < \frac{\sigma_0^2(1-\nu)}{\mu\gamma} \quad (4.3)$$

где в соответствии с формулой (2.2)

$$\sigma_0 = 2\mu \frac{1+\nu}{1-\nu} [\alpha(T_1 - T_0) + \beta C_0] \quad (4.4)$$

Таким образом, критическое значение λ_* длины волны возмущения первоначально плоской поверхности равно

$$\lambda_* = \frac{2\pi}{|k_*|} = \frac{\pi\gamma(1-\nu)}{2\mu(1+\nu)^2 [\alpha(T_1 - T_0) + \beta C_0]^2} \quad (4.5)$$

Значение λ_h длины волны, соответствующей наибольшей скорости роста волнистости, равно

$$\lambda_h = \frac{4\lambda_*}{3} = \frac{2\pi\gamma(1-\nu)}{3\mu(1+\nu)^2 [\alpha(T_1 - T_0) + \beta C_0]^2} \quad (4.6)$$

Именно эта величина сравнивалась с экспериментальными данными.

5. Заключение. Настоящее исследование демонстрирует приоритетную роль поверхностной диффузии в задачах неустойчивости поверхностного слоя. Параметр λ_h удовлетворительно описывает экспериментально измеренную волнистость (см. фигуру), возникающую в результате воздействия лазерного излучения.

Величина λ_h зависит от температуры нагрева поверхностного слоя, от средней плотности дефектов C_0 в нем, от поверхностной энергии материала и его упругих модулей.

Авторы признательны Ю.В. Судьенкову и Н.В. Поникарову за предоставленные экспериментальные данные и совместное обсуждение результатов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (96-01-00411), (96-01-01334), (97-01-01164), (98-01-01010) и научного фонда (95 IN-RU-481).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Емельянов В.И., Шлыков Ю.Г. Нелинейная многомодовая теория генерации поверхностных дефекто-деформационных структур под действием мощного лазерного излучения // Изв. РАН. Сер. физич. 1993. Т. 57. № 12. С. 18–38.
2. Балашин Ю.А., Судьенков Ю.В., Юревич В.И. Особенности разрушения оптических поверхностей металлов при воздействии коротких лазерных импульсов // Тез. докл. 8-й Всесоюз. конф. "Взаимодействие оптического излучения с веществом". Л. Гос. оптич. ин-т. 1990. Т. 1. С. 116.
3. Морозов Н.Ф., Паукито М.В., Товстик П.Е. Устойчивость поверхностного слоя при термонагрузении // Изв. РАН. МТТ. 1998. № 1. С. 130–139.
4. Морозов Н.Ф., Паукито М.В., Товстик П.Е. Влияние объемной диффузии на потерю устойчивости поверхностного слоя при термонагрузении // Изв. РАН. МТТ. 1998 (в печати).
5. Rice J.R., Chuang T.J. Energy variations in diffusive cavity growth // J. Amer. Ceram. Soc. 1981. V. 64. No. 1. P. 46–53.
6. Freund L.B. Evolution of waviness on the surface of a strained elastic solid due to stress-driven diffusion // Intern. J. Solid Structure. 1995. V. 32. No. 6/7. P. 911–923.
7. Asaro R.J., Tiller W.A. Interface morphology development during stress-corrosion cracking: Pt 1. Via surface diffusion // Metallurg. Trans. 1972. V. 3. No. 7. P. 1789–1796.
8. Srolovitz D.J. On the stability of surface of stressed solids // Acta Met. 1989. V. 37. No. 2. P. 621–625.
9. Crinfield M.A. The stress driven instabilities in elastic crystals: mathematical models and physical manifestations // J. Nonlinear Sci. 1993. V. 3. No. 1. P. 35–83.
10. Новацкий В. Теория упругости. М.: Мир, 1975. 872 с.
11. Михлин С.Г., Морозов Н.Ф., Паукито М.В. Интегральные уравнения в теории упругости // СПб. Изд-во. С.-ПбГУ. 1994. 272 с.

Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
10.04.1998